

1993 год

Полярная и s - d обменная модели Шубина – Вонсовского *

С. В. Вонсовский

(материал подготовлен учеником С. В. Вонсовского
М. И. Кацнельсоном)

Сергей Васильевич Вонсовский намеревался в книге «Воспоминания» рассказывать о своих научных публикациях, остановиться подробно на статьях с С. П. Шубиным 1934–1936 гг., содержащих формулировку так называемых «полярной и s - d обменной моделей кристалла». Эти работы сыграли исключительную роль в жизни и научной деятельности Сергея Васильевича, и, насколько мне известно, он считал их своим самым большим вкладом в физику. К сожалению, Сергей Васильевич не успел выполнить это свое намерение.

Мне довелось – и в связи с совместной научной работой, и при подготовке к изданию трудов С. П. Шубина – многократно обсуждать с Сергеем Васильевичем полярную и s - d обменную модели, а также связанные с ними вопросы. Мне кажется, точка зрения Сергея Васильевича не очень сильно бы отличалась оттого, что я попробую здесь изложить.

С самого начала развития квантовой теории твердого тела в конце 20-х гг. было ясно, что физики столкнулись с очень сложной задачей большого числа сильно взаимодействующих между собой частиц (электронов). Как решать такие задачи, никто тогда не знал – современный математический аппарат, основанный на так называемом методе функций Грина, фейнмановских диаграммах и других сложных вещах, появился только через 25–30 лет. Поэтому использовались

простейшие модельные представления. С одной стороны, развивалась (прежде всего, в работах Ф. Блоха, Р. Пайерлса, А. Вильсона) одно-электронная зонная модель, основанная на полном пренебрежении межэлектронным взаимодействием. Учитывалось лишь взаимодействие электрона с периодическим кристаллическим полем ионной решетки кристалла. Эта модель позволила, в частности, решить многие вопросы, связанные с электропроводностью металлов и полупроводников. С другой стороны, в работах В. Гейзенберга и других физиков (в частности, того же Блоха) была сформулирована много-электронная гомеоплярная модель (называемая сейчас именем Гейзенберга), описывающая специфическое обменное взаимодействие, ответственное за ферромагнетизм, но полностью игнорирующая процессы перескока электронов с атома на атом и потому не способная учесть процессы электропроводности. Считалось, что она описывает магнитные свойства диэлектрических кристаллов. В то же время наиболее известные магнитные вещества – железо, кобальт, никель – являются металлами. Для их описания необходимо было синтезировать зонную теорию и модель Гейзенберга. Эта задача и была решена Шубиным и Вонсовским в трех статьях, опубликованных в ведущем английском журнале тех лет *Proceedings of Royal Society* (vol. A145, p. 159 (1934)) и в издававшемся в Харькове на немецком языке журнале *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* (B. 7, S. 292 (1935); B. 10, S. 348 (1936)).

Модель, изложенная в этих работах, получила название полярной модели кристалла. В ней рассматривалась решетка, состоящая из атомов с одним электроном, который может находиться в одном невырожденном квантовом состоянии. Межэлектронное взаимодействие, а также процессы перескока электронов с узла на узел, учитывались точно. На каждом атоме (узле кристаллической решетки) в полярной модели может находиться электрон со спином вправо, влево, два электрона с противоположно направленными спинами («двойка») или вообще не быть электронов («дырка»). Задание номеров узлов, находящихся в каждом из перечисленных четырех состояний, однозначно определяет состояние всего кристалла. Такая модель позволяет в многоэлектронной схеме в принципе рассматривать процессы перемещения электрически заряженных «двоек» и «дырок» по объему кристалла, т. е. процессы электропроводности.

Дальнейшее решение задачи сводилось к записи в соответствующих переменных основного уравнения квантовой механики – уравнения Шредингера. С помощью современных математических методов

эта задача решается достаточно просто. Но в 30-е гг. единственной общепотребительной техникой для рассмотрения многоэлектронных задач был так называемый метод слэтеровских детерминантов – чрезвычайно громоздкий и требующий большого мастерства при применении к конкретным задачам. Я видел черновики – упорство Сергея Васильевича, безошибочно пробирающегося к правильному ответу в лабиринте очень запутанных выкладок, вызывает восхищение! У математиков бытует полусушутливое высказывание, что «репутация математика определяется числом неуклюжих работ». Пионерские работы обычно действительно не слишком изящны, и один из крупнейших теоретиков современности, американец Ф. Андерсон, имел некоторые основания (в 1988 г.) назвать основополагающую работу Шубина и Вонсовского «непрозрачной», но она была первой и лежала в основе всего последующего развития этой области физики! Здесь проявился научный стиль Сергея Васильевича – забота в первую очередь не о математическом изяществе, а о физической содержательности.

Что же реально было сделано в этих работах и почему они до сих (спустя более чем 60 лет) цитируются в физической литературе? Прежде всего, ценным оказалось само использованное там описание многоэлектронных систем в терминах состояния отдельных атомов. Такой способ описания – атомное представление – был сначала не очень популярен, будучи вытесненным так называемым «методом вторичного квантования» (полярная модель была переформулирована на этом языке Н. Н. Боголюбовым в 1947 г.), потом он был переоткрыт английским физиком Дж. Хаббардом в 1965 г. Описание в терминах состояния отдельных атомов оказалось очень эффективным инструментом для систем с сильным взаимодействием. Первыми это продемонстрировали Шубин и Вонсовский в 1934 г.! Интересно, что этот метод в общем и «не прижился» по-настоящему в западной теоретической физике, но до сих пор является «фирменным приемом» российских, в особенности принадлежащих к школе Вонсовского, теоретиков, работающих в области квантовой теории магнетизма.

Если говорить о физических результатах, важнейшим является демонстрация того, что, вопреки зонной теории Блоха – Вильсона, система, рассматриваемая в полярной модели, является не металлом, а диэлектриком (изолятором) при достаточно большом межатомном расстоянии. Сейчас это широко известно и... связывается исключительно с именем английского физика Н. Мотта, основополагающие работы которого о «моттовских изоляторах» появились лишь после войны. Думаю, что Сергея Васильевича это очень задевало, но – что

очень характерно для него – он никогда не предпринимал, как и в других подобных случаях, никаких специальных усилий для отстаивания своего приоритета. Можно лишь надеяться, что время все расставит на свои места. Если же говорить о значении этого результата для современной физики, достаточно лишь одного факта: сверхпопулярные сейчас медь-кислородные высокотемпературные сверхпроводники рассматриваются большинством исследователей как «легиРОВанные моттовские изоляторы».

Другим важным результатом, прямо связанным с работами Шубина и Вонсовского, является объяснение дробности магнитных моментов (в естественных единицах – магнетонах Бора) ферромагнитных металлов, например, железа. Этот результат был получен в 1937 г. учеником Гейзенберга Л. Ортелем, который прямо ссылался на Шубина и Вонсовского и использовал их метод расчета. Физическая идея – дробность магнитных моментов как результат конкуренции межэлектронного взаимодействия на одном узле и процессов перескока электронов – до сих пор должна считаться совершенно правильной, хотя конкретные расчетные методы изменились за 60 лет очень сильно.

Следует отметить также содержащееся в статьях по полярной модели предсказание возможности зарядовоупорядоченного состояния в многоэлектронной системе кристалла (двойка – дырка – двойка – дырка...). По-видимому, конкретные детали описания такого состояния в работах Шубина и Вонсовского устарели, но само явление обсуждалось, кажется, впервые (знаменитые сейчас работы Вигнера и Фервея появились несколько позже).

Наконец, в работе 1936 г. впервые написано выражение для параметра так называемого «кинетического обменного взаимодействия». Эта идея была затем развита в упоминавшихся выше работах Н. Н. Боголюбова. К великому сожалению, и здесь приоритет российской науки отстоять не удалось – весь этот круг идей связывается сейчас исключительно с именем Ф. Андерсона, действительно внесшего огромный вклад в соответствующую область физики, но уже в 50-е гг.

Вторым, после полярной модели, важнейшим вкладом Сергея Васильевича Вонсовского в физику было создание и развитие так называемой s - d (или s - f) обменной модели, предназначенной для описания магнетизма переходных и редкоземельных металлов, их сплавов и соединений. Эта модель выглядела так: пусть имеется система d -электронов, которая описывается гейзенберговской гомеополярной моделью, и зонный s -электрон. В такой модели учиты-

ваются обменные процессы между s -электроном и любым d -электроном, кроме того, s -электрон может двигаться по узлам кристаллической решетки металла, занятых d -электронами, тем самым участвуя в явлении электропроводности металла. Естественно, что эта s - d (или s - f) обменная модель описывает переходные металлы с недостроенными d или f оболочками.

Такая модель разрабатывалась Шубиным и Вонсовским в 1936–1937 гг., но их работа так и не была закончена и статья не подготовлена к публикации из-за ареста Семена Петровича. Впервые черновой вариант статьи был опубликован в сб.: Шубин С. П. Избранные труды по теоретической физике. Свердловск: «Наука», 1991. С. 180–198). Основная идея этой модели в несколько другой форме была опубликована Сергеем Васильевичем уже после войны (ЖЭТФ. 1946. Т. 16. С. 981); окончательный формальный вид модель приобрела в работе С. В. Вонсовского и Е. А. Турова (ЖЭТФ. 1953. Т. 24. С. 419). В западной литературе (например, в известном учебнике Дж. Займана «Принципы теории твердого тела») она часто называется «моделью Вонсовского–Зинера», что до некоторой степени может быть оправдано (первая работа на эту тему известного американского физика К. Зинера опубликована в 1951 г.

Один из центральных вопросов модели – это природа «разделения» электронов проводимости в переходных металлах на локализованные и коллективизированные (подробно об этом см.: Вонсовский С. В., Кацнельсон М. И., Трефилов А. В. // ФММ. 1993. Т. 76, вып. 3. С. 3–89; вып. 4. С. 3–93). В s - d обменной модели такое разделение *постулируется* вместе с определенным видом взаимодействия локализованных (d) и коллективизированных (s) электронов. Это дает возможность продвинуться гораздо дальше в получении конкретных физических результатов. Локализованные электроны ответственны главным образом за магнитные свойства, а коллективизированные – за электрические, оптические и сверхпроводящие, и наиболее важный круг вопросов, изучаемых в рамках s - d обменной модели – это влияние магнетизма на немагнитные свойства металлов и сплавов. По крайней мере, именно этот круг вопросов был в центре внимания Сергея Васильевича и его учеников.

Другая важная сторона – влияние электронов проводимости на магнитные свойства «локализованной» электронной подсистемы – была, по-видимому, впервые рассмотрена К. Зинером в уже упоминавшейся работе, а затем более детально японскими физиками Т. Касуя и К. Иосида. Результатом было открытие так называемого «косвенного

го обменного взаимодействия Рудермана–Киттеля–Касуя–Иосида (РККИ)». Напрямую эти вопросы не рассматривались в опубликованных работах Сергея Васильевича.

Постановка вопроса о влиянии «магнитной» подсистемы переходного металла на коллективизированные электроны оказалась удивительно содержательной. Уже в первых работах Сергея Васильевича по s - d обменной модели обсуждалась проблема магнитного вклада в электросопротивление ферромагнитных металлов. Впоследствии эта задача была решена (для области умеренно низких температур) Е. А. Туровым. В общей своей постановке она оказалась весьма сложной, и такие вопросы, как температурная зависимость электросопротивления и других кинетических свойств металлов в отсутствие так называемых «одномагнитных» процессов рассеяния, рассмотренных Туровым (такое бывает при очень низких температурах или в так называемых полуметаллических ферромагнетиках) актуальны до сих пор (см.: Ирхин В. Ю., Кацнельсон М. И. // УФН. 1994. Т. 164. С. 705).

Самый большой сюрприз ожидал физиков при применении s - d обменной модели к задаче об электросопротивлении разбавленных магнитных сплавов. Но здесь надо немного остановиться и кое-что пояснить.

В общем случае многочастичные (например, многоэлектронные) проблемы квантовой механики представляют исключительную сложность. Обычно их удается решить в случае малости взаимодействия, когда работает простой и эффективный метод его учета, называемый теорией возмущений. Так вот, оказалось, что в s - d обменной модели при рассмотрении *мало*го взаимодействия электронов проводимости с локализованным магнитным моментом примеси теория возмущений *не* работает! Этот факт был обнаружен японским физиком Дж. Кондо в 1963 г. При этом ему удалось объяснить загадочный эффект роста электросопротивления некоторых разбавленных сплавов при понижении температуры, остававшийся непонятым в течение почти 30 лет. Позднейшие исследования, в которых приняли участие такие известные теоретики как А. А. Абрикосов, П. Нозьер, Ф. Андерсон, К. Вильсон и многие другие, привели к решению «проблемы Кондо» (проблема была в том, что делать, когда стандартные методы решения многоэлектронных задач не работают), а в 1980 г. было получено ее формальное точное решение (советским физиком-теоретиком П. Вигманом и американским Н. Эндрю). Считается, что проблема Кондо стимулировала развитие математического аппарата теоретической

физики как ни одна другая задача за последние полвека. Сейчас в центре внимания физиков системы из многих «кондовских центров» – так называемые «решетки Кондо». Работа Кондо 1963 г. действительно открыла целый мир. И вместе с тем, *модель*, которая содержит в себе все это богатство, – это все-таки s - d обменная модель Вонсовского.

Из других направлений, развиваемых в рамках s - d обменной модели, следует отметить проблему сосуществования и взаимного влияния магнетизма и сверхпроводимости. Впервые она была поставлена в работах Сергея Васильевича и М. С. Свирского, выполненных в начале 60-х гг. Были получены важные и физически правильные результаты. Техническая сторона дела потом была развита учениками Сергея Васильевича, в особенности в работах Ю. А. Изюмова и его сотрудников. Важность всего этого направления характеризуется, например, тем, что магнитный механизм (притяжение электронов через обмен спиновыми флуктуациями) рассматривается сейчас большинством физиков как наиболее вероятная причина знаменитой высокотемпературной сверхпроводимости в медькислородных соединениях. Таким образом, поставленные Сергеем Васильевичем проблемы до сих пор остаются в центре внимания ученых.

Сергей Васильевич активно интересовался вопросами, связанными с развитием полярной и s - d обменной моделей, всю свою последующую жизнь. Эта модель интересна и очень содержательна до сих пор. Закончу еще одним личным воспоминанием. Когда мы писали (уже в 90-е гг.) с Сергеем Васильевичем и Сашей Трефиловым большой обзор о локализованном и делокализованном поведении электронов в металлах, каждая глава снабжалась эпиграфом. Окончательный отбор эпиграфа из предложенных вариантов делал Сергей Васильевич. Для главы о полярной модели он выбрал цитату из ницшевского «Заратустры»: «Медленно течет жизнь всех глубоких родников: долго должны ждать они, пока узнают, что упало в глубины их».

* Данный текст взят из приложения к книге С. В. Вонсовского «Воспоминания» (Изд. «Екатеринбург», 1999).